量子力学A演習 解答例 （演習11）

1.　4-3-3節の有限深さの井戸型ポテンシャル　$V(x)=\begin{cases}0 & |x|\le \frac{a}{2}\\ V_0 & |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$ において、$E<V_0$ の時、$x=\pm a/2$ で波動関数とその１次微分が連続となる条件より、

偶パリティの場合　$k\tan(ka/2)=\alpha$ 、奇パリティの場合　$-k\cot(ka/2)=\alpha$

なるエネルギー固有値を求める式が得られることを示しなさい。ただし、$k=\sqrt{2mE}/\hbar$

（解答例）波動関数は、

偶パリティの場合：$\varphi_{even}(x)=\begin{cases}De^{+\alpha x} & x<-\frac{a}{2}\\ B\cos kx & -\frac{a}{2}\le x\le +\frac{a}{2}\\ Ce^{-\alpha x} & x>\frac{a}{2}\end{cases}$　,　$\dfrac{d\varphi_{even}(x)}{dx}=\begin{cases}\alpha De^{+\alpha x} & x<-\frac{a}{2}\\ -kB\sin kx & -\frac{a}{2}\le x\le +\frac{a}{2}\\ -\alpha Ce^{-\alpha x} & x>\frac{a}{2}\end{cases}$

なので、$x=+a/2$　で波動関数 $\varphi_{even}(x)$ とその１次微分 $\dfrac{d\varphi_{even}(x)}{dx}$ が連続となる条件は、

$$B\cos\left(k\frac{a}{2}\right)=Ce^{\left(-\alpha\frac{a}{2}\right)}\ \cdots(1)\text{、}\ -kB\sin\left(k\frac{a}{2}\right)=-\alpha Ce^{\left(-\alpha\frac{a}{2}\right)}\cdots(2)$$

(2)式を(1)式で割ることにより、$k\tan(ka/2)=\alpha$　が得られる。

$x=-a/2$　で $\varphi_{even}(x)$ と $\dfrac{d\varphi_{even}(x)}{dx}$ が連続となる条件は、

$$B\cos\left(-k\frac{a}{2}\right)=De^{\left(-\alpha\frac{a}{2}\right)}\ \cdots(3)\text{、}\ -kB\sin\left(-k\frac{a}{2}\right)=\alpha De^{\left(-\alpha\frac{a}{2}\right)}\cdots(4)$$

(4)式を(3)式で割ることにより、同じ　$k\tan(ka/2)=\alpha\ \cdots\ (5)$　が得られる。

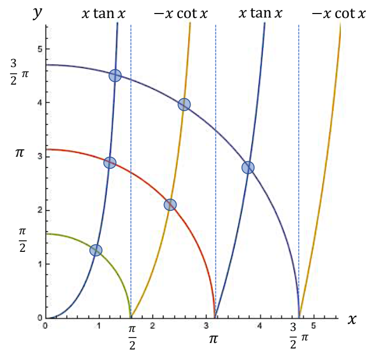
同様にして、奇パリティの場合、　$-k\cot(ka/2)=\alpha\ \cdots\ (6)$　が求まる（略）。

[参考]

一方、$k^2=2mE/\hbar^2$ 、$\alpha^2=2m(V_0-E)/\hbar^2$ なので、$k^2+\alpha^2=2mV_0/\hbar^2\cdots(7)$

$x\equiv\dfrac{ka}{2},\ y\equiv\dfrac{\alpha a}{2}$ と置くと、(5),(6),(7)式はそれぞれ、

$y=x\tan x\cdots(8),\quad y=-x\cot x\cdots(9),\quad x^2+y^2=\dfrac{ma^2V_0}{2\hbar^2}\cdots(10)$ となる。よって、有限井戸の固有値は(8)と(10)の交点、および、(9)と(10)の交点となる。これらの関係を右図に示す。



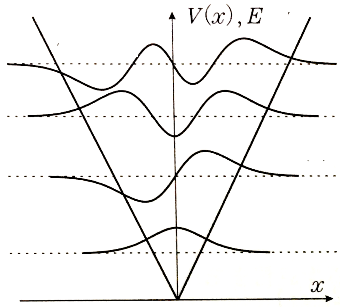
式(10）は円の方程式であるから、図より、$\dfrac{ma^2V_0}{2\hbar^2}<\left(\dfrac{\pi}{2}\right)^2$ のとき、

すなわち、$a^2V_0<\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m}$のときは、交点が１つ（固有状態が１つ）、

$\left(\dfrac{\pi}{2}\right)^2<\dfrac{ma^2V_0}{2\hbar^2}<\pi^2$ のときは交点は２つ（固有状態が2つ）、のように、a^2V_0 が増えるにつれ、交点の数（固有状態の数）は増えていく。無限井戸では、$a^2V_0\to\infty$ なので、交点の数は、離散的ではあるが、無限個存在する。そのとき、交点の$x\equiv\dfrac{ka}{2}=\dfrac{\pi}{2},\pi,\dfrac{3\pi}{2},\ldots$

なので、　$k=\dfrac{n\pi}{a}\quad(n=1,2,3,\ldots)$ となり、無限大井戸の結果に一致する（4-3-1節の式(4-3-12)）.

2. 次のようなポテンシャルがある時、固有関数はどのような形となるか。定性的に考察し、量子数がn=1, 2, 3 に対応する固有関数の概略の形を描け[1]



（解答例）

(1) $V(x) = a\,|x\,|$ の場合を右上図に示した。

（**注意**：右上図中の量子数は下からn=1, 2, 3, 4 になっている）。

概略図を書くポイントは、

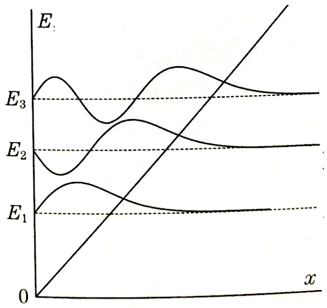
・$V(x)$は偶関数なので固有関数は偶関数（偶パリティ）か奇関数（奇パリティ）

・基底状態(n=1)は偶関数。励起状態は奇関数(n=2)、偶関数(n=3)、奇関数(n=4)、…。

・節の数はn-1個現れる。

・x が大で運動エネルギーが減るのでxと共に、固有関数の振幅は大きくなり、波長は長くなる（4-3-4節参照）。

・ポテンシャルの外では固有関数は浸み出し減衰。ただし、(4-3-41)式のV_0がxで変化するので単純な指数関数ではなく、$\varphi(x) \sim e^{-\alpha(x)x}$ のようにα は x の関数になる。すなわち $\alpha(x) \propto \sqrt{V(x) - E}$ なので、xとともにα は大きくなり減衰の度合いは大きくなる。



(2) $V(x) = a\,x \quad (x > 0),\ \infty \quad (x \le 0)$ の場合を右下図に示す。概略図を書くポイントは、x<0 でポテンシャルは ∞ なので、**x=0で全ての固有関数は０になる**（4-2-1節の条件５）。これは、x>0 のポテンシャルをx=0の軸で折り返し、偶関数ポテンシャルを作った場合の奇パリティの固有関数のx=0での条件に対応している。x>0 のポテンシャルは(1)のポテンシャルと同じ形なので、結局、**求める固有関数は、(1)のポテンシャルの奇パリティ固有関数のみになる。**

３.時間に依存するSchrödinger方程式から、局所的な確率保存を表す「連続の式」

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0$$ が導けることを示せ。

ただし、ρ は確率密度 $|\psi(x,t)|^2$、また、$j(x,t)$ は確率の流れの密度、

$$j(x,t) \equiv \frac{\hbar}{2im}\Big(\psi^*(x,t)\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x}\psi(x,t)\Big)$$

である。また、$\psi(x,t) = A\,e^{ikx}e^{-i\omega t}$ の時、$j = |A|^2(\hbar k/m) = \rho v$ となることを示せ。

さらに、「連続の式」を狭い範囲で積分し、確率保存を表すことを示しなさい。

（解答例）

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (*)$$

時間に依存するSchrödinger方程式とその複素共役から、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi\Big),\qquad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V\psi^*\Big)$$

これを、(*) に代入して $\displaystyle \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V\psi^*\Big)\psi + \psi^*\frac{1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi\Big) = \frac{\hbar}{2im}\Big(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Big)$

一方、$\displaystyle \frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\Big(\psi^*(x,t)\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x}\psi(x,t)\Big) = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \qquad \therefore \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0$

$\psi(x,t) = A\,e^{ikx}e^{-i\omega t}$ の時、これを$j(x,t)$の式に代入すれば、$j = |A|^2(\hbar k/m) = \rho v$ となる（証明略）

連続の式 $\displaystyle \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}$ の両辺を積分すると、

$$\int_a^b \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}dx = -\int_a^b \frac{\partial j(x,t)}{\partial x}dx,\qquad \frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \rho(x,t)dx = -\int_a^b \frac{\partial j(x,t)}{\partial x}dx = j(a,t) - j(b,t)$$

最後の式は、「粒子を $a \le x \le b$ の領域に見出す確率」の時間変化は、単位時間に、「その領域の左端から流れ込む**確率の流れの密度**（単位時間に入り込む確率流）」から「その領域の右端から流れ出る確率の流れの密度（単位時間に出ていく確率流）」を引いたものになっていることを意味する。これは確率保存を表す。「連続の式」は積分区間が微小になる極限（微分形）なので、局所的な確率保存を表している。

---

[1] 図中のE_1, E_2 E_3の位置は正確に記しているわけでは無い

４．4-4-2節の階段型ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$ において、粒子が$-\infty$ から $E < V_0$のエネルギーでやってくる時、

1) $x \geq 0$ の波動関数が $\varphi_2(x) = A\left(\dfrac{2k_1}{k_1 + i\alpha}\right)e^{-\alpha x}$ となることを示せ。ただし、$\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$、$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$

2) 反射率が１になることを示しなさい。

3) φ_2 で 確率の流れの密度 j_T を計算し０となることを示せ。

4) V_0 が 10 eV の時、E が 6 eV の電子を$x < 0$ から入射した。$x > 0$ に浸み出す波動関数の距離がどの程度か計算せよ。ただし、浸み出す波動関数の距離は、電子を見出す確率が$x = 0$ での値の$1/e$ になる距離とする。

（解答例）

（１）(4-4-18)式にならって、$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0)$、$\varphi_2(x) = Ce^{-\alpha x} \quad (x > 0)$ とおく。

$x = 0$ での波動関数と波動関数の微分の連続の条件は、

$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad \to A + B = C$、　　$\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \quad \to ik_1A - ik_1B = -\alpha C$　（ダッシュの記号は微分を表す）

これらより、$C = A\left(\dfrac{2k_1}{k_1 + i\alpha}\right)$ 、$\therefore \varphi_2(x) = A\left(\dfrac{2k_1}{k_1 + i\alpha}\right)e^{-\alpha x}$

(2) $A + B = C$ より $\dfrac{B}{A} = \dfrac{C}{A} - 1 = \dfrac{k_1 - i\alpha}{k_1 + i\alpha}$ 、　反射率 $R = \dfrac{k_1|B|^2}{k_1|A|^2} = 1$

(3) $j_T = \dfrac{\hbar}{2im}\left(\varphi_2^*\dfrac{\partial\varphi_2}{\partial x} - \dfrac{\partial\varphi_2^*}{\partial x}\varphi_2\right) = \dfrac{\hbar}{2im}\left(\varphi_2^*(-\alpha\varphi_2) - (-\alpha\varphi_2^*)\varphi_2\right) = 0$

(4) $\varphi_2(x) = Ce^{-\alpha x}$、$|\varphi_2(x)|^2 = |C|^2e^{-2\alpha x}$

$x = \dfrac{1}{2\alpha}$ の時、$|\varphi_2|^2$ が $\dfrac{1}{e}$ になる。　$\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ を使って計算すると、$x = 4.9 \times 10^{-11}m$ （〜0.5 Å）

$(\hbar = 1.05 \times 10^{-34}\mathrm{J \cdot s},\ 1\mathrm{eV} = 1.6 \times 10^{-19}\mathrm{J},\ \mathrm{m} = 9.1 \times 10^{-31}\mathrm{kg})$